

01

## Обмен энергией между дискретными бризерами в кристалле со структурой NaCl

© А.А. Кистанов, С.В. Дмитриев

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа

E-mail: andrei.kistanov.ufa@gmail.com

Поступило в Редакцию 13 февраля 2013 г.

Для кристаллов со структурой NaCl с сильно отличающейся массой компонент, при нулевой температуре, методом молекулярной динамики показана возможность существования комплексов близко расположенных щелевых дискретных бризеров (ДБ). Показано, что ДБ, составляющие комплексы, способны обмениваться энергией, что является дополнительным каналом передачи энергии по кристаллу. Полученные результаты могут быть использованы при обсуждении экспериментально обнаруженного явления упорядочения щелевых ДБ в кристалле NaI при температуре 555 К.

Одним из актуальных направлений во многих областях современной физики является изучение нелинейных, пространственно локализованных колебательных мод — дискретных бризеров (ДБ), которые могут возбуждаться в бездефектных решетках как при нулевой, так и при конечных температурах [1–6]. С точки зрения приложений весьма важным развитием концепции ДБ стало понятие квазибризера, введенное в работе Чечина с соавторами [7].

Молекулярно-динамическое исследование щелевых ДБ в кристаллах со структурой NaCl началось работой Киселева и Сиверса [8]. После экспериментального обнаружения ДБ в кристалле NaI [9,10] возникла новая волна интереса к компьютерному моделированию их свойств [11–15]. В работе [10], при изучении фононных спектров кристалла NaI, измеренных методом неупругого рассеяния нейтронов, было выдвинуто предположение о существовании упорядоченного расположения ДБ, что подразумевает возможность обмена энергией между ними.

Вопрос о движении ДБ по кристаллу является важным для понимания их роли в формировании физических свойств кристаллов. Нередко

ДБ привязаны к определенному решеточному узлу, но в ряде случаев они могут быть подвижными [16]. Движущиеся ДБ могут сталкиваться друг с другом, приводя к локализации значительной энергии в точке столкновения, которая может расходоваться на создание дефектов кристаллической структуры или на активизацию фазовых переходов или разрушения. Кроме того, исследовались процессы столкновения движущихся ДБ с несовершенствами кристаллической решетки, например, с примесями [17].

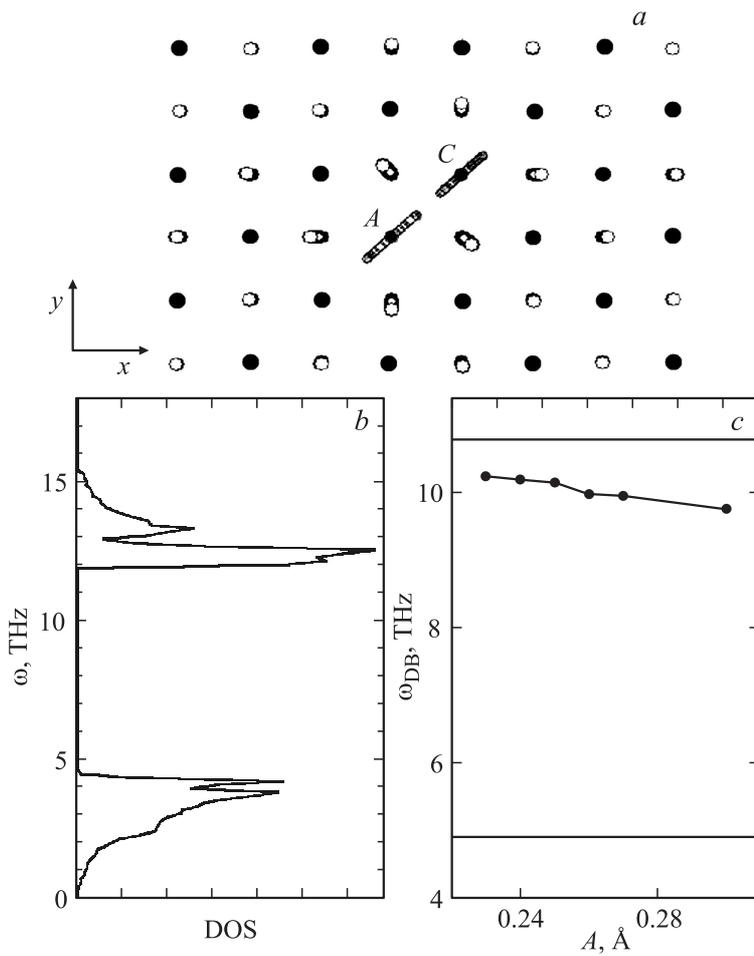
В данной работе изучается вопрос подвижности щелевых ДБ в кристалле со структурой NaCl.

Рассматривается модель со структурой NaCl и параметром решетки  $a = 6.25 \text{ \AA}$ . Данная структура состоит из двух ГЦК-решеток, сдвинутых относительно друг друга на вектор  $(a/2, 0, 0)$ , в узлах одной из них располагаются легкие атомы, а другой — тяжелые. Каждый из атомов имеет шесть соседей противоположного типа, находящихся на вершинах правильного октаэдра. Каждая кубическая трансляционная ячейка состоит из четырех легких и четырех тяжелых атомов. Взаимодействие атомов описывается парными потенциалами, учитывающими кулоновские взаимодействия, борн-майеровское отталкивание и дисперсионное взаимодействие [11]. Атомная масса легкого (тяжелого) компонента принималась равной 10 (100) g/mol. Расчетная ячейка с наложенными периодическими граничными условиями содержала  $N = 8 \times 8 \times 8$  ячеек периодичности кристалла.

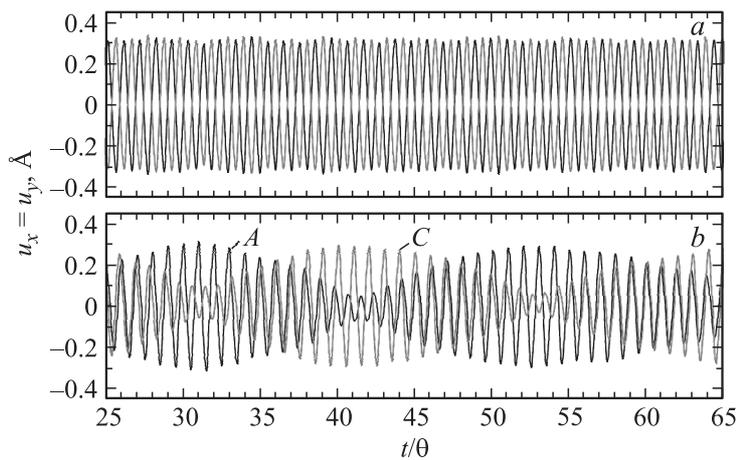
Щелевые ДБ в рассматриваемом кристалле локализованы на легких атомах [11]. Оказалось возможным возбуждение пар близко расположенных ДБ, как показано на стробоскопической картине движения пары легких атомов, обозначенных А и С (рис. 1, *a*). Эти атомы осциллируют в противофазе с большой амплитудой, в то время, как соседние атомы колеблются со значительно меньшими амплитудами.

На рис. 1, *b* показана плотность фононных состояний рассматриваемого кристалла. Видно, что присутствует достаточная широкая щель в фононном спектре в диапазоне от 4.4 до 11.8 THz. Частота пары ДБ типа АС лежит в щели фононного спектра и уменьшается с увеличением амплитуды ДБ, как это показано на рис. 1, *c*. Уменьшение частоты с ростом амплитуды свидетельствует о мягком типе нелинейности изучаемой колебательной моды.

На рис. 2 для пары ДБ построены компоненты перемещения  $u_x = u_y$  ( $u_z = 0$ ), как функции безразмерного времени  $t/\Theta$ . Здесь  $\Theta$  — период



**Рис. 1.** *a* — стробоскопическая картина движения атомов, показывающая пару ДБ. Атомы А и С колеблются в противофазе в направлении [110] с большими амплитудами. Легкие (тяжелые) атомы показаны светлыми (темными) символами. *b* — плотность фоновых состояний для рассматриваемого кристалла. *c* — частота пары ДБ А и С в зависимости от амплитуды ДБ (точки, соединенные линией). Горизонтальные линии показывают границы щели фоновонного спектра кристалла.

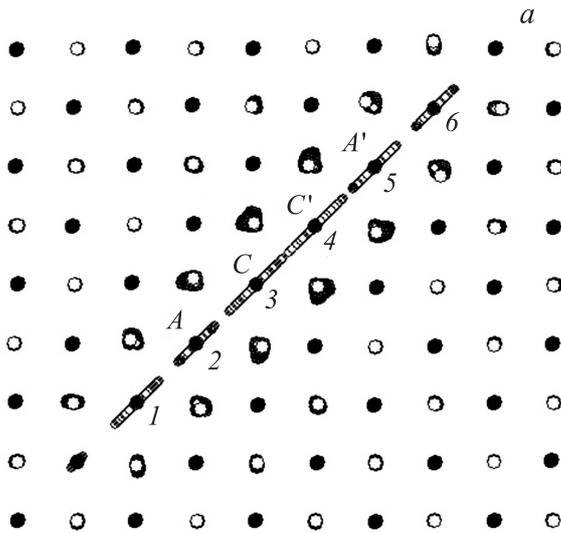


**Рис. 2.** Перемещения  $u_x = u_y$  ( $u_z = 0$ ) как функции безразмерного времени для атомов А и С, составляющих пару ДБ. Два атома колеблются: *a* — в противофазе, *b* — со сдвигом фаз. В последнем случае наблюдается обмен энергией между ДБ.

колебания ДБ. На рис. 2, *a* атомы А и С колеблются в противофазе, а на рис. 2, *b* — со сдвигом фаз. В последнем случае наблюдается обмен энергией между ДБ.

Представляется интересным исследовать взаимодействие между двумя парами ДБ, АС и А'С', расположенными как показано на рис. 3, *a*. Для обеих пар задавался начальный сдвиг фаз такой же, как в случае, представленном на рис. 2, *b*. Стробоскопическая картина движения атомов (рис. 3, *a*) показывает, что атомы 3 и 6, которые не возбуждались при задании начальных условий, получили достаточно большую энергию от возбужденных пар ДБ. Таким образом, возможен не только обмен энергией между ДБ, принадлежащими одной паре, но и передача энергии от пар ДБ к невозбужденным атомам. Иными словами, ДБ могут перемещаться по кристаллу.

На рис. 3, *b* для атомов 1–6 соответствующими кривыми представлены компоненты перемещения  $u_x = u_y$  как функции безразмерного времени. Хорошо видно, что в образовавшемся кластере ДБ происходит обмен энергией, вследствие чего атомы, не возбужденные в начальный момент времени, могут приобретать значительную энергию.

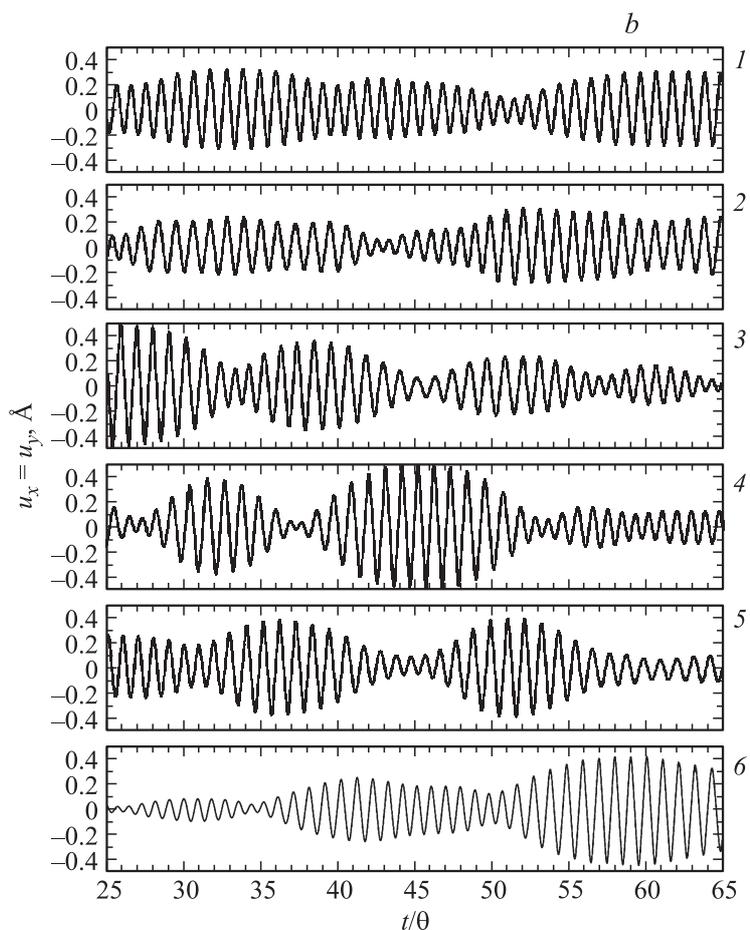


**Рис. 3.** *a* — стробоскопическая картина движения атомов для случая, когда изначально возбуждались две пары ДБ:  $AC$  и  $A'C'$ . Атомы 3 и 6 не возбуждались при задании начальных условий. *b* — кривые с 1 по 6 показывают перемещения  $u_x = u_y$  легких атомов, обозначенных на (*a*) цифрами 1–6 соответственно, как функции безразмерного времени.

В заключение отметим, что в ходе проведенных исследований комплексов ДБ в кристалле со структурой NaCl при нулевой температуре показана возможность возбуждения пар ДБ на соседних легких атомах в положениях  $A$  и  $C$  (рис. 1, *a*), колеблющихся в направлении  $[110]$ . При наличии разности фаз колебаний двух ДБ наблюдается обмен энергией между ними (рис. 2, *b*). Показана возможность движения ДБ по кристаллу при возбуждении двух пар ДБ поляризации  $[110]$  (рис. 3, *b*).

Возможность обмена энергией между ДБ является необходимым условием возникновения упорядоченных структур ДБ, наблюдавшихся в работе [10].

Каждый ДБ локализует достаточно большую энергию (порядка  $1\text{ eV}$ ) [11], а в комплексах ДБ локализуется еще большее количество энергии. Движущиеся ДБ могут сталкиваться, что также приводит к



**Рис. 3** (продолжение).

повышению степени локализации энергии в кристалле. Известно, что ДБ могут возникать спонтанно в условиях теплового равновесия при конечных температурах. В связи с этим большой интерес представляет дальнейшее исследование комплексов ДБ в состоянии теплового равновесия, которые могут способствовать термоактивному зарождению дефектов кристаллической структуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант РФФИ 11-08-97057-р\_поволжье\_а.

## Список литературы

- [1] *Sievers A.J., Takeno S.* // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 61. P. 970.
- [2] *Campbell D.K., Flach S., Kivshar Yu.S.* // Phys. Today. 2004. V. 57. P. 43.
- [3] *Flach S., Gorbach A.V.* // Phys. Rep. 2008. V. 467. P. 1.
- [4] *Manley M.E.* // Acta Mater. 2010. V. 58. P. 2926.
- [5] *Дмитриев С.В.* // Письма о материалах. 2011. Т. 1. № 2. С. 78–83.
- [6] *Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Захаров П.В., Пожидаева О.В.* // Письма в ЖТФ. 2011. Т. 37. С. 7.
- [7] *Chechin G.M., Dzhelauhova G.S., Mehonoshina E.A.* // Phys. Rev. E. 2006. V. 74. P. 036608.
- [8] *Kiselev S.A., Sievers A.J.* // Phys. Rev. 1997. V. 55. P. 5755.
- [9] *Manley M.E., Sievers A.J., Lynn J.W., Kiselev S.A., Agladze N.I., Chen Y., Llobet A., Alatas A.* // Phys. Rev. B. 2009. V. 79. P. 134304.
- [10] *Manley M.E., Abernathy D.L., Agladze N.I., Sievers A.J.* // Scientific Reports. 2011. V. 1. P. 4.
- [11] *Khadeeva L.Z., Dmitriev S.V.* // Phys. Rev. B. 2010. V. 81. P. 214306.
- [12] *Кистанов А.А., Дмитриев С.В.* // ФТТ. 2012. Т. 54(8). С. 1545.
- [13] *Кистанов А.А., Баимова Ю.А., Дмитриев С.В.* // Письма в ЖТФ. 2012. Т. 38(14). С. 72.
- [14] *Кистанов А.А., Дмитриев С.В.* // Письма о материалах. 2012. Т. 2(3). С. 143.
- [15] *Баимова Ю.А., Дмитриев С.В.* // Письма в ЖТФ. 2011. Т. 81(11). С. 71.
- [16] *Chen D., Aubry S., Tsironis G.P.* // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. P. 4776.
- [17] *Cuevas J., Palmero F., Archilla J.F.R., Romero F.R.* // J. Phys. A. 2002. V. 35. P. 10519.